

ФОТОИНДУЦИРОВАННЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ПОЛУПРОВОДНИК – МЕТАЛЛ В СИСТЕМЕ ПАЙЕРЛСА

А. Л. Семенов*

Ульяновский государственный университет
432970, Ульяновск, Россия

Поступила в редакцию 7 июня 2006 г.

Получены уравнение динамики для параметра порядка фазового перехода металл–полупроводник и кинетическое уравнение для концентрации неравновесных электронно-дырочных пар системы Пайерлса в световом поле. Из данных уравнений в случае сверхкороткого светового импульса найдено выражение для времени τ нетеплового фотоиндуцированного фазового перехода полупроводник–металл. Показано, что для инициирования фазового перехода плотность энергии W светового импульса должна превышать критическое значение W_c . Рассчитанные в рамках предложенной модели численные значения W_c , τ и коэффициента оптического поглощения γ_0 согласуются с экспериментальными данными ($W_c \approx 12$ мДж/см², $\tau \approx 75$ фс, $\gamma_0 \approx 10^5$ см⁻¹) по облучению пленки двуокиси ванадия лазерным импульсом с длительностью $\tau_p \approx 15$ фс, энергией фотонов $\hbar\omega_0 = 1.6$ эВ и плотностью энергии $W = 50$ мДж/см².

PACS: 71.45.Lr, 78.20.-e

1. ВВЕДЕНИЕ

Из эксперимента известен ряд материалов, электронные свойства которых могут быть описаны в рамках модели Пайерлса и ее различных модификаций. Наиболее изученными из них являются комплексы платины со смешанной валентностью [1], голубые бронзы $K_{0.3}MoO_3$ и $Rb_{0.3}MoO_3$ [2, 3], соли TCNQ [1], TaS_3 [2, 3], VO_2 [4, 5], $TaSe_3$, NbS_3 , $NbSe_3$, $(NbSe_4)_{10/3}I$, $(NbSe_4)_2I$ и др. [3]. В электронном спектре данных соединений на уровне Ферми имеется квазиодномерная зона, образованная при перекрытии гантелеобразных волновых функций d - или f -электронов соседних атомов, расположенных в виде параллельных цепочек.

Модель Пайерлса, рассматриваемая в настоящей статье, представляет собой цепочку атомов, на каждом из которых находится по одному внешнему электрону. В высокотемпературной металлической фазе атомы в цепочке расположены эквидистантно, а зона проводимости электронного спектра заполнена электронами наполовину. При охлаждении, когда температура достигает критического значения T_0 , металлическая фаза становится

неустойчивой и происходит фазовый переход металл–полупроводник. Этот переход характеризуется образованием запрещенной зоны в электронном спектре системы на уровне Ферми и попарным сближением атомов вдоль атомной цепочки [1]. При этом сама атомная цепочка деформируется [6].

Термодинамически равновесный фазовый переход металл–полупроводник (либо полупроводник–металл) в системе Пайерлса может быть инициирован давлением (как одноосным так и всесторонним) [4, 7], нарушением идеальности кристаллической решетки (в частности, при легировании примесями замещения) [1, 4, 5, 8–10], постоянным электрическим полем [11, 12], адсорбцией молекул из газовой фазы и т.д. [12–14]. Вблизи критической точки T_0 в пленке из пайерлсовского материала возможно образование одномерной пространственно-периодической гетерофазной структуры чередующихся металлической и полупроводниковой фаз [12, 15, 16].

Различного вида термодинамически неравновесные фотостимулированные неустойчивости и фазовые переходы в системе с перестраиваемым электронным спектром рассматривались авторами работ [17–25]. В статьях [18–22], в частности, было показано, что при облучении пайерлсовского полу-

*E-mail: smnv@mail.ru

проводника световым полем с частотой, превышающей ширину запрещенной зоны ε электронного спектра, происходит рост концентрации n неравновесных электронно-дырочных пар и, как следствие, плавное уменьшение ширины запрещенной зоны. Когда же концентрация n достигает некоторого критического значения n_c , имеет место скачкообразное обращение ε в нуль (фотоиндуцированный фазовый переход полупроводник – металл).

Благодаря особенностям электронного спектра пайерлсовского полупроводника (наличие особых точек Ван Хофа [23], резких [24] или размытых [25] краев запрещенной зоны), в световом поле со специально подобранной центральной частотой оптического спектра возможны фотоиндуцированные переходы из одного полупроводникового состояния в другое [23–25]. Вблизи критической точки этих переходов в системе Пайерлса наблюдается безрезонаторная оптическая бистабильность при нарастающем поглощении [17, 26].

Исследования динамики изменения структуры кристаллической решетки и ширины запрещенной зоны электронного спектра полупроводника при его облучении световым полем проводились для различных материалов в работах [27–36]. Было показано, что при больших концентрациях неравновесных носителей могут возникать периодические осцилляции параметров системы во времени [27–29] и в пространстве [19, 30, 31]. Образующееся новое состояние в зависимости от конкретных условий является металлом [17, 18, 27, 32], полупроводником с другой кристаллической модификацией [33], аморфным твердым телом [33], гетерофазной структурой [19, 21, 30, 31, 34–36].

Широкий интерес вызывает теоретическое и экспериментальное исследование низкотемпературной полупроводниковой фазы системы Пайерлса в переменном низкочастотном или постоянном электрическом поле, направленном вдоль главной оси квазиодномерного кристалла [2, 3, 37–44]. При напряженности постоянного электрического поля, превышающей некоторое пороговое значение, в системе возникает коллективная нелинейная проводимость вследствие депиннинга и начала скольжения волны зарядовой плотности вдоль атомной цепочки. Слабое переменное электрическое поле вызывает колебания волны зарядовой плотности около положения равновесия. Этот колебательный отклик системы на внешнее гармоническое воздействие имеет резонансный характер [3].

В литературе имеются две альтернативные точки зрения на причину образования полупроводнико-

вой фазы в двуокиси ванадия: электрон-электронное взаимодействие, рассматриваемое обычно в рамках модели Мотта – Хаббарда [45], и электрон-фононное взаимодействие (модель Пайерлса) [46]. В связи с этим представляет интерес исследование фотоиндуцированного фазового перехода полупроводник – металл в системе Пайерлса и сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными данными по двуокиси ванадия.

В настоящей работе исследуется динамика пайерлсовского полупроводника в световом поле, в котором благодаря электродипольному взаимодействию фотонов с электронной подсистемой полупроводника происходит фотостимулированная генерация неравновесных электронно-дырочных пар. Рост этой концентрации посредством электрон-фононного взаимодействия вызывает изменения кристаллической структуры и электронного спектра системы Пайерлса. Получены уравнение динамики для параметра порядка фазового перехода металл – полупроводник и кинетическое уравнение для концентрации неравновесных электронно-дырочных пар. Из данных уравнений в случае сверхкороткого светового импульса найдено выражение для времени τ фотоиндуцированного фазового перехода полупроводник – металл. Показано, что для инициирования фазового перехода плотность энергии W светового импульса должна превышать некоторое критическое значение W_c . Проведено сравнение с экспериментом по облучению пленки двуокиси ванадия мощным лазерным импульсом.

2. ГАМИЛЬТониАН И ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР СИСТЕМЫ

Рассмотрим цепочку атомов, на каждом из которых находится по одному внешнему электрону. Гамильтониан электронной подсистемы в приближении сильной связи запишем в виде [1]

$$H = \sum_j B_{j,j+1} (a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j), \quad (2.1)$$

где j — номер атома в цепочке, $B_{j,j+1}$ — интеграл перекрытия электронных волновых функций соседних атомов, a_j^\dagger и a_j — операторы рождения и уничтожения электрона на j -м атоме.

Для узкозонных систем (в частности, для модели Пайерлса) расстояния $r_{j,j+1}$ между j -м и $(j+1)$ -м атомами в несколько раз превышают эффективный радиус R атомной волновой функции электрона. В

этом случае интеграл перекрытия $B_{j,j+1}$ определяется следующим выражением [47]:

$$B_{j,j+1} \propto \exp\left(-\frac{r_{j,j+1}}{R}\right). \quad (2.2)$$

Координату j -го атома в цепочке запишем в форме

$$x_j = jr_0 + \frac{R\xi}{2} \cos(\pi j), \quad (2.3)$$

где r_0 — межатомное расстояние в металлической фазе, ξ — параметр удвоения периода одномерного кристалла, характеризующий величину попарного сближения атомов (параметр порядка фазового перехода металл – полупроводник). С учетом соотношения $r_{j,j+1} = x_{j+1} - x_j$ из (2.2), (2.3) получаем

$$B_{j,j+1} = b \exp[(-1)^j \xi], \quad (2.4)$$

где b — интеграл перекрытия в металлической фазе (при $\xi = 0$). Фазы атомных волновых функций в гамильтониане (2.1) выбираются таким образом, что b в выражении (2.4) является действительной величиной.

Для диагонализации гамильтониана (2.1) воспользуемся методом канонических преобразований Боголюбова [48]. Перейдем к коллективным фермиевским операторам вторичного квантования c_k, c_k^+ по формуле

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikj}, \quad (2.5)$$

где N — число атомов в цепочке единичной длины, $k = -\pi + 2\pi s/N$, $s = 1, 2, \dots, N$, $c_{k+2\pi} = c_k$. В новом операторном представлении гамильтониан (2.1) принимает вид

$$H_1 = \sum_k 2b (c_k^+ c_k \operatorname{ch} \xi \cos k + i c_k^+ c_{k-\pi} \operatorname{sh} \xi \sin k). \quad (2.6)$$

Выполним в (2.6) еще одно каноническое преобразование фермиевских операторов α_k, α_k^+ в соответствии с соотношением

$$c_k = \frac{\alpha_k + i\varphi_k \alpha_{k-\pi}}{\sqrt{1 + \varphi_k^2}}, \quad (2.7)$$

где функция φ_k подбирается таким образом, чтобы получившийся гамильтониан в новых переменных α_k, α_k^+ имел диагональный вид:

$$H = \sum_k \varepsilon_k \alpha_k^+ \alpha_k. \quad (2.8)$$

После подстановки соотношения (2.7) в (2.6) и приравнивания нулю недиагональных элементов находим φ_k и закон дисперсии ε_k :

$$\varphi_k = \frac{\operatorname{ch} \xi \cos k - \operatorname{sign}(\cos k) \sqrt{\cos^2 k + \operatorname{sh}^2 \xi}}{\operatorname{sh} \xi \sin k}, \quad (2.9)$$

$$\varepsilon_k = 2b \operatorname{sign}(\cos k) \sqrt{\cos^2 k + \operatorname{sh}^2 \xi}. \quad (2.10)$$

Из соотношения (2.10) видно, что спектр ε_k при $\xi \neq 0$ имеет две зоны, нижняя из которых в основном состоянии полностью заполнена, а верхняя пустая (полупроводниковая фаза). При $\xi = 0$ спектр (2.10) представляет собой одну наполовину заполненную зону (металлическая фаза).

3. ОПЕРАТОР ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА

Оператор дипольного момента системы Пайерлса в приближении сильной связи определяется соотношением [49]

$$\mathbf{d} = \sum_j (\mathbf{d}_{j,j+1} a_j^+ a_{j+1} + \mathbf{d}_{j,j+1}^* a_{j+1}^+ a_j), \quad (3.1)$$

где зависимость $\mathbf{d}_{j,j+1}$ от ξ аналогична соотношению (2.4):

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{j,j+1} &= -e \int_V \psi_j^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_{j+1}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \\ &= (\mathbf{d}_1 + i\mathbf{d}_2) \exp[(-1)^j \xi]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Здесь $\psi_j(\mathbf{r})$ — атомная волновая функция электрона, находящегося на j -м узле, e — заряд электрона. Выбор фаз волновых функций $\psi_j(\mathbf{r})$, обеспечивающий действительность интеграла перекрытия (2.4), однозначно определяет \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2 в выражении (3.2).

Подставляя формулу (2.5) в (3.1), с учетом (3.2) и тождества $\exp[(-1)^n \xi] = \operatorname{ch} \xi + (-1)^n \operatorname{sh} \xi$ находим

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= 2 \sum_k [\operatorname{ch} \xi (\mathbf{d}_1 \cos k - \mathbf{d}_2 \sin k) c_k^+ c_k + \\ &+ i \operatorname{sh} \xi (\mathbf{d}_1 \sin k + \mathbf{d}_2 \cos k) c_k^+ c_{k-\pi}]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Переходя в последнем выражении к фермиевским операторам α_k, α_k^+ в соответствии с соотношением (2.7), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= \sum_k \left\{ \left[\frac{\mathbf{d}_1 \varepsilon_k}{b} - \frac{2\mathbf{d}_2}{1 + \varphi_k^2} [(1 - \varphi_k^2) \operatorname{ch} \xi \sin k + \right. \right. \\ &+ \left. \left. 2\varphi_k \operatorname{sh} \xi \cos k] \right] \alpha_k^+ \alpha_k + i \frac{2\mathbf{d}_2}{1 + \varphi_k^2} \times \right. \\ &\times \left. [(1 - \varphi_k^2) \operatorname{sh} \xi \cos k - 2\varphi_k \operatorname{ch} \xi \sin k] \alpha_k^+ \alpha_{k-\pi} \right\}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Следует отметить формальное сходство операторов (2.1) и (3.1) при $\mathbf{d}_2 = 0$. Аналогичное сходство поэтому имеют и операторы (2.8) и (3.4).

Пусть в отсутствие внешнего электрического поля суммарный дипольный момент системы равен нулю. Тогда из соотношений (3.4), (2.10) следует, что $\mathbf{d}_1 = 0$. Таким образом, выбор фаз волновых функций $\psi_j(\mathbf{r})$, при котором интеграл $B_{j,j+1}$ в (2.1) является действительной величиной, в рассматриваемом случае обеспечивает мнимость межузельного матричного элемента $\mathbf{d}_{j,j+1}$ оператора дипольного момента в (3.1). Случай $\mathbf{d}_1 \neq 0$, по-видимому, может быть реализован в системах, обладающих сегнетоэлектрическими свойствами. Такие системы в данной работе не рассматриваются. При $\xi \rightarrow 0$, как видно из выражения (2.9), $\varphi_k \rightarrow 0$ для всех $k \neq \pm\pi/2$. Поэтому в (3.4) $\mathbf{d}_{k,k-\pi} \rightarrow 0$ и все дипольные переходы запрещены. Если $\xi \neq 0$, то в (3.4) $\mathbf{d}_{k,k-\pi} \neq 0$ и соответствующие дипольные переходы разрешены. Поскольку в этом случае первой зоной Бриллюэна является область $k \in (-\pi/2, \pi/2]$, данные переходы оказываются вертикальными межзонными в спектре (2.10).

4. УРАВНЕНИЯ ДИНАМИКИ ДЛЯ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЫ ПАЙЕРЛСА

Рассмотрим поведение низкотемпературной фазы системы Пайерлса при возбуждении в ней неравновесных электронно-дырочных пар. Известно, что характерное время внутризонной релаксации электронов, $\tau_e \sim 10^{-14}$ с, значительно меньше времени межзонной релаксации, $\tau_1 \sim 10^{-11}$ с [50]. Поэтому можно приближенно считать [51], что внутри каждой электронной зоны устанавливается термодинамическое равновесие между электронами со своим соответствующим данной зоне квазиуровнем Ферми. Вызванное внешним облучением нарушение термодинамического равновесия между зонами выражается различием соответствующих квазиуровней Ферми между собой.

Эволюция параметра порядка ξ во времени описывается уравнением Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}} - \frac{\partial L}{\partial \xi} = Q, \quad (4.1)$$

где Q — обобщенная диссипативная сила, соответствующая обобщенной координате ξ , L — функция Лагранжа,

$$L = \sum_n \frac{m \dot{x}_n^2}{2} - F_1 - F_2 - F_c, \quad (4.2)$$

m — масса атома,

$$F_j = \mu_j N_j - 2k_B T \sum_k \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu_j - \varepsilon_k}{k_B T} \right) \right] \quad (4.3)$$

— свободная энергия электронной подсистемы валентной зоны ($j = 1$) и зоны проводимости ($j = 2$). Суммирование по k в (4.3) идет в пределах j -й зоны спектра (2.10) ($|k| < \pi/2$ для $j = 2$ и $\pi/2 < |k| < \pi$ для $j = 1$), μ_j и N_j — соответственно квазиуровень Ферми и число электронов j -й зоны, T — температура, k_B — постоянная Больцмана. Коэффициент 2 перед знаком суммы в выражении (4.3) учитывает спиновое вырождение. В формуле (4.2) F_c — энергия кристаллической решетки,

$$F_c = \frac{\gamma_1}{2} \sum_j (r_{j,j+1} - r_0)^2, \quad (4.4)$$

γ_1 — коэффициент жесткости решетки при смещениях атомов (2.3).

С учетом соотношений (2.3) и $r_{j,j+1} = x_{j+1} - x_j$ из выражения (4.4) находим

$$F_c = \frac{A}{2} \xi^2, \quad (4.5)$$

где $A = \gamma_1 N R^2$.

Подставляя в уравнение (4.1) функцию Лагранжа (4.2), с учетом выражений (4.3), (4.5) получаем

$$\ddot{\xi} = \frac{4}{NmR^2} \times \left\{ QN - A\xi + 2 \sum_{|k| < \pi/2} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \xi} [1 - p_k - n_k] \right\}, \quad (4.6)$$

где

$$n_k = \left[1 + \exp \left(\frac{\varepsilon_k - \mu_2}{k_B T} \right) \right]^{-1}, \quad (4.7)$$

$$p_k = \left[1 + \exp \left(\frac{\varepsilon_k - \mu_1}{k_B T} \right) \right]^{-1}$$

— числа заполнения электронами (дырками) k -го уровня зоны проводимости (валентной зоны). При $T = 0$ в отсутствие облучения электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне отсутствуют, $n_k = p_k = 0$, а параметр порядка ξ фазового перехода металл — полупроводник равен ξ_0 . Тогда в приближении времени релаксации ($Q \sim \dot{\xi}$) из уравнения (4.6) при $\xi < 1$ приближенно находим

$$A = \frac{4bN}{\pi} \ln \frac{4}{\xi_0}, \quad (4.8)$$

$$\ddot{\xi} + \gamma_p \dot{\xi} = \frac{16b\xi}{\pi m R^2} \left[\ln \frac{\xi_0}{\xi} - \frac{\pi b}{N} \sum_{|k| < \pi/2} \frac{p_k + n_k}{\varepsilon_k} \right], \quad (4.9)$$

где γ_p^{-1} — характерное время фононной релаксации. Подставляя величины n_k и p_k из (4.7) в уравнение (4.9), при условии $k_B T \ll b$, $|\mu_j| < 2b\xi + k_B T$ приближенно получаем

$$\ddot{\xi} + \gamma_p \dot{\xi} = \frac{16b}{\pi m R^2} \left[\xi \ln \frac{\xi_0}{\xi} - \frac{\pi}{2N} (n + p) \right], \quad (4.10)$$

где n и p — соответственно концентрации электронов и дырок.

5. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ИЗЛУЧЕНИЕМ

Взаимодействие системы со световым полем будем описывать оператором V_1 , который в дипольном приближении имеет вид

$$V_1 = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(t) = -\mathbf{d} \cdot \int \mathbf{E}_\omega e^{-i\omega t} d\omega, \quad (5.1)$$

где \mathbf{E}_ω и ω — соответственно амплитуда и частота спектральной компоненты светового поля.

Рассмотрим случай, когда падающее излучение $\mathbf{E}(t)$ является линейно поляризованным вдоль оси кристалла квазимонохроматическим стационарным случайным процессом [52]. Тогда все спектральные компоненты \mathbf{E}_ω статистически независимы [52, 53]:

$$\langle \mathbf{E}_\omega \cdot \mathbf{E}_{\omega_1} \rangle = G(\omega) \delta(\omega + \omega_1). \quad (5.2)$$

Здесь $G(\omega)$ — спектральная плотность светового поля, которая в гауссовой системе для квазимонохроматического сигнала может быть представлена в виде [52]

$$G(\omega) = \frac{2\pi}{c n_s} I g(|\omega| - \omega_0), \quad (5.3)$$

где c — скорость света, n_s — показатель преломления среды, ω_0 — несущая частота, $g(x)$ — неотрицательная функция колоколообразной формы с максимумом в точке $x = 0$, удовлетворяющая условию нормировки

$$\int g(x) dx = 1. \quad (5.4)$$

Ширина $\Delta\omega$ спектра $G(\omega)$ удовлетворяет неравенству $\Delta\omega \ll \omega_0$. В выражении (5.3)

$$I = \frac{c n_s}{4\pi} \int G(\omega) d\omega \quad (5.5)$$

— интенсивность светового поля.

Используя уравнение Лиувилля [54]

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H + V_1, \rho], \quad (5.6)$$

с учетом соотношений (5.1), (5.2) находим уравнение для диагональных элементов ρ_{kk} матрицы плотности ρ электронной подсистемы во втором порядке теории возмущений по V_1 :

$$\frac{\partial \rho_{kk}}{\partial t} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_s |\mathbf{d}_{ks}|^2 G \left(\frac{\varepsilon_s - \varepsilon_k}{\hbar} \right) (\rho_{ss} - \rho_{kk}), \quad (5.7)$$

где \mathbf{d}_{ks} — матричный элемент оператора дипольного момента (3.4). В частном случае монохроматического светового поля

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \cos(\omega_0 t + \varphi) \quad (5.8)$$

с равномерно распределенной случайной фазой φ выражение для спектральной плотности $G(\omega)$ имеет вид

$$G(\omega) = \frac{\mathbf{E}_0^2}{4} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)]. \quad (5.9)$$

Тогда уравнение (5.7) переходит в хорошо известное золотое правило Ферми для вероятности вынужденных переходов [53]:

$$\frac{\partial \rho_{kk}}{\partial t} = \frac{\pi}{2\hbar} |\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{d}_{kk}|^2 \delta(2\varepsilon_k - \hbar\omega_0). \quad (5.10)$$

Здесь предполагается, что валентная зона полностью заполнена, а зона проводимости пуста.

С учетом соотношений (3.4), (4.7) из уравнения (5.7) получаем

$$\frac{\partial \rho_{kk}}{\partial t} = \frac{2\pi}{\hbar^2} d_k^2 G \left(\frac{2\varepsilon_k}{\hbar} \right) (1 - n_k - p_k), \quad (5.11)$$

где

$$d_k = \frac{2d_2}{1 + \varphi_k^2} \times \left| (1 - \varphi_k^2) \operatorname{sh} \xi \cos k - 2\varphi_k \operatorname{ch} \xi \sin k \right|. \quad (5.12)$$

Из выражения (5.11) находим кинетическое уравнение для концентрации

$$n = 2 \sum_{|k| \leq \pi/2} \rho_{kk}$$

электронов в зоне проводимости системы Пайерлса:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{4\pi}{\hbar^2} \sum_{|k| \leq \pi/2} d_k^2 (1 - n_k - p_k) G \left(\frac{2\varepsilon_k}{\hbar} \right) - \frac{n - n_0}{\tau_1}, \quad (5.13)$$

где n_0 — концентрация электронов в зоне проводимости в отсутствие светового поля, которую с учетом соотношения (4.7) можно записать в следующем приближенном виде:

$$n_0 = n(\mu_j = 0) = \begin{cases} N \sqrt{\frac{k_B T \operatorname{sh} \xi}{\pi b}} \exp \left\{ -\frac{2b \operatorname{sh} \xi}{k_B T} \right\}, & b\xi \gg k_B T, \\ \frac{N}{\pi} \left(\frac{k_B T}{b} \ln 2 - \frac{b}{2k_B T} \xi^2 \right), & b\xi \ll k_B T. \end{cases} \quad (5.14)$$

Последнее слагаемое в правой части уравнения (5.13) учитывает межзонную электронную релаксацию с характерным временем τ_1 межзонной электронной релаксации. Время τ_1 для излучательной и безызлучательной рекомбинаций электронно-дырочных пар, а также рекомбинации с участием примесей и дефектов в общем случае зависит от концентрации электронов и дырок [51, с. 297], однако в дальнейшем этой зависимостью будем пренебрегать, считая τ_1 заданным параметром.

Для монохроматического светового поля функция формы $g(x)$ в выражении (5.3) определяется соотношением

$$g(x) = \delta(x). \quad (5.15)$$

Перейдем в уравнении (5.13) от суммирования к интегрированию по dE , учитывая, что плотность электронных состояний $\nu(E)$, соответствующая спектру (2.10), имеет вид

$$\nu(E) = \frac{2N|E|}{\pi \sqrt{(4b^2 \operatorname{ch}^2 \xi - E^2)(E^2 - 4b^2 \operatorname{sh}^2 \xi)}}, \quad (5.16)$$

а матричный элемент оператора дипольного момента d_k (5.12) при $E_k = E$ в соответствии с выражениями (2.9), (2.10) определяется соотношением

$$d(E) \equiv d_k(E_k = E) = \frac{4bd_2 \operatorname{ch} \xi \operatorname{sh} \xi}{E}. \quad (5.17)$$

Тогда в предположении отсутствия насыщения межзонных оптических переходов, когда выполняется соотношение

$$n_k + p_k \ll 1, \quad (5.18)$$

из уравнения (5.13) получаем

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{n - n_0}{\tau_1} + \frac{\gamma I}{\hbar \omega_0}, \quad (5.19)$$

где

$$\gamma = \frac{512N\pi b^2 d_2^2 \operatorname{ch}^2 \xi \operatorname{sh}^2 \xi}{\hbar c n_s} \times \left\{ \sqrt{[16b^2 \operatorname{ch}^2 \xi - (\hbar \omega_0)^2][(\hbar \omega_0)^2 - 16b^2 \operatorname{sh}^2 \xi]} \right\}^{-1/2} \quad (5.20)$$

— коэффициент оптического поглощения пайерлсовского полупроводника.

6. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ПОД ДЕЙСТВИЕМ СВЕРХКОРОТКОГО СВЕТОВОГО ИМПУЛЬСА

Рассмотрим поведение пайерлсовского полупроводника на временах $t \ll \tau_1$, γ_p^{-1} при облучении его сверхкоротким световым импульсом, длительность которого много меньше всех характерных времен задачи. В этом случае релаксационными членами в уравнениях (4.10), (5.19) можно пренебречь, и с учетом равенства $n = p$ эти уравнения принимают вид

$$\ddot{\xi} = -\frac{\partial U}{\partial \xi}, \quad (6.1)$$

где

$$U(\xi) = \frac{16b}{\pi m R^2} \left(\frac{\pi n_1}{N} \xi + \frac{\xi^2}{2} \ln \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\xi^2}{4} \right), \quad (6.2)$$

n_1 — концентрация электронно-дырочных пар после прохождения импульса,

$$n_1 = \frac{(1-r)\gamma_0 W}{\hbar \omega_0}, \quad (6.3)$$

$$W = \int_{-\infty}^{\infty} I dt \quad (6.4)$$

— плотность энергии светового поля. В соотношении (6.3) $\gamma_0 = \gamma(\xi = \xi_0)$ и учитывается отражение света от плоской поверхности полупроводника с коэффициентом отражения r . Решая уравнение (6.1) с начальными условиями

$$\xi(t=0) = \xi_0, \quad \dot{\xi}(t=0) = 0, \quad (6.5)$$

находим время фотоиндуцированного фазового перехода полупроводник–металл:

$$\tau = \int_0^{\xi_0} \frac{d\xi}{\sqrt{2[U(0) - U(\xi)]}}. \quad (6.6)$$

Вычисляя приближенно этот интеграл, с учетом соотношения (6.3) получаем

$$\tau = \left[\frac{2b}{\pi m R^2} \left(\frac{W}{W_c} - 1 \right) \right]^{-1/2}, \quad (6.7)$$

где

$$W_c = \frac{\xi_0 N \hbar \omega_0}{4\pi \gamma_0 (1-r)} \quad (6.8)$$

— критическая плотность энергии лазерного импульса. Из выражения (6.7) видно, что при $W \rightarrow W_c + 0$ имеем $\tau \rightarrow \infty$. Таким образом, фотоиндуцированный фазовый переход полупроводник – металл носит пороговый характер ($W > W_c$).

Численные оценки проведем для двуокиси ванадия, квазиодномерная электронная зона проводимости которой образуется благодаря перекрытию волновых функций $3d$ -электронов атомов ванадия, расположенных в виде цепочек, параллельных кристаллической оси c [4]. При температуре ниже критического значения $T_0 = 340$ К атомы ванадия в цепочке попарно сближаются, а в электронном спектре на уровне Ферми формируется запрещенная зона [4]. Возьмем характерные для VO_2 численные значения физических величин [4, 6]: $N \approx 3 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ — концентрация атомов ванадия, $4b \approx 1.1$ эВ — ширина d -зоны проводимости в металлической фазе, $m \approx 8.5 \cdot 10^{-23}$ г — масса атома ванадия, $R \approx 5 \cdot 10^{-9}$ см — эффективный радиус атомной волновой функции электрона в $3d$ -состоянии, $n_s \approx 3.3$ — показатель преломления в полупроводниковой фазе, $4b \text{ sh } \xi_0 \approx 1.3$ эВ ($\xi_0 \approx 1$) — расстояние между потолком валентной d -зоны и дном d -зоны проводимости электронного спектра в полупроводниковой фазе, $\tau_1 = 3 \cdot 10^{-11}$ с [50] — характерное время межзонной электронной релаксации, $\gamma_p^{-1} \approx 5 \cdot 10^{-13}$ с [55] — характерное время фононной релаксации при комнатной температуре, $d_2 \approx 4 \cdot 10^{-19}$ ед. СГС [17, 53] — матричный элемент оператора дипольного момента, $r \approx 0.2$ [56] — коэффициент оптического отражения.

Для фотонов с энергией $\hbar \omega_0 = 1.6$ эВ из выражений (5.20), (6.7), (6.8) находим коэффициент оптического поглощения $\gamma_0 \approx 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ и критическую плотность энергии лазерного импульса $W_c \approx 18 \text{ мДж/см}^2$; при облучении лазерным импульсом с плотностью энергии $W = 50 \text{ мДж/см}^2$ время фазового перехода составляет $\tau \approx 50$ фс. Полученные теоретические значения близки к экспериментальным данным: коэффициент оптического поглощения (для $\hbar \omega_0 = 1.6$ эВ) $\gamma_0 \approx 10^5 \text{ см}^{-1}$ [4]; критическая плотность энергии лазерного импульса для нетеплового фазового перехода полупроводник – металл $W_c \approx 12 \text{ мДж/см}^2$ [57]; при облучении

лазерным импульсом длительностью $\tau_p \approx 15$ фс с энергией фотонов $\hbar \omega_0 = 1.6$ эВ и плотностью энергии $W = 50 \text{ мДж/см}^2$ время фазового перехода полупроводник – металл равно $\tau \approx 75$ фс [56].

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная в настоящей работе модель позволяет объяснить экспериментальные данные [56, 57] по нетеплому фотоиндуцированному фазовому переходу полупроводник – металл в пленках двуокиси ванадия. Рассчитанные значения коэффициента оптического поглощения γ_0 , критической плотности энергии W_c светового импульса и времени τ фазового перехода согласуются с экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Н. Булаевский, УФН **115**, 263 (1975).
2. С. Н. Артеменко, А. Ф. Волков, С. В. Зайцев-Зотов, УФН **166**, 434 (1996).
3. G. Gruner, Rev. Mod. Phys. **60**, 1129 (1988).
4. А. А. Бугаев, Б. П. Захарченя, Ф. А. Чудновский, *Фазовый переход металл – полупроводник и его применение*, Наука, Ленинград (1979), с. 28.
5. А. Л. Семенов, ФТТ **36**, 1974 (1994).
6. А. Л. Семенов, ЖЭТФ **117**, 1175 (2000).
7. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, Вестник МГУ, серия 3, физика, астрономия **30**, 52 (1989).
8. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, ФТТ **31**, 261 (1989).
9. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, Вестник МГУ, серия 3, физика, астрономия **31**, 99 (1990).
10. А. Л. Семенов, С. В. Сухов, Изв. вузов, Физика, вып. 6, 120 (1996).
11. И. В. Криве, А. С. Рожавский, ЖЭТФ **81**, 1811 (1981).
12. А. Л. Семенов, ФТТ **42**, 1125 (2000).
13. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, А. Л. Семенов, Вестник МГУ, серия 3, физика, астрономия **29**, 98 (1988).

14. В. И. Емельянов, Н. Л. Левшин, С. Ю. Поройков, А. Л. Семенов, Вестник МГУ, серия 3, физика, астрономия **32**, 63 (1991).
15. В. И. Емельянов, А. Л. Семенов, ФТТ **32**, 3083 (1990).
16. А. Л. Семенов, Е. Н. Солодовникова, ФТТ **42**, 170 (2000).
17. А. В. Андреев, В. И. Емельянов, Ю. А. Ильинский, *Кооперативные явления в оптике: Сверхизлучение. Бистабильность. Фазовые переходы*, Наука, Москва (1988), с. 256.
18. А. А. Бугаев, В. В. Гудялис, Б. П. Захарченя и др., Письма в ЖЭТФ **34**, 452 (1981).
19. K. F. Berggren and V. A. Huberman, Phys. Rev. B **18**, 3369 (1978).
20. В. Ф. Елесин, В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ **71**, 714 (1976).
21. В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, С. Н. Молотков, Микроэлектроника **12**, 499 (1983).
22. А. Л. Семенов, ФТТ **40**, 2113 (1998).
23. А. Л. Семенов, ЖЭТФ **114**, 1407 (1998).
24. А. Л. Семенов, ЖЭТФ **111**, 1398 (1997).
25. А. Л. Семенов, ЖЭТФ **111**, 2147 (1997).
26. Х. Гиббс, *Оптическая бистабильность. Управление светом с помощью света*, Мир, Москва (1988), с. 108.
27. Ю. В. Копаев, В. В. Меняйленко, С. Н. Молотков, ЖЭТФ **89**, 1404 (1985).
28. И. М. Суслов, Письма в ЖЭТФ **39**, 547 (1984).
29. В. Б. Стопачинский, И. М. Суслов, ЖЭТФ **91**, 314 (1986).
30. В. И. Емельянов, И. Ф. Уварова, ЖЭТФ **94**, 255 (1988).
31. А. Л. Семенов, ЖЭТФ **115**, 1297 (1999).
32. А. Л. Семенов, ЖЭТФ **116**, 2154 (1999).
33. V. I. Emel'yanov and D. V. Babak, Laser Phys. **7**, 514 (1997).
34. Р. Ф. Мамин, ЖЭТФ **111**, 1465 (1997).
35. С. А. Ахманов, В. И. Емельянов, Н. И. Коротеев, В. Н. Семиногов, УФН **147**, 675 (1985).
36. Э. Шель, *Самоорганизация в полупроводниках*, Мир, Москва (1991).
37. А. В. Дмитриев, Н. А. Журавлев, В. Л. Волков, ФТТ **32**, 3420 (1990).
38. В. Е. Минакова, Ю. И. Латышев, В. А. Волков, Письма в ЖЭТФ **62**, 442 (1995).
39. Ф. Я. Надь, М. Ю. Иткис, Письма в ЖЭТФ **63**, 246 (1996).
40. P. A. Lee and T. M. Rice, Phys. Rev. B **19**, 3970 (1978).
41. С. А. Бразовский, И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **71**, 2338 (1976).
42. Л. П. Горьков, Е. Н. Долгов, ЖЭТФ **77**, 396 (1979).
43. С. Н. Артеменко, А. Ф. Волков, ЖЭТФ **80**, 2018 (1981).
44. С. Н. Артеменко, А. Ф. Волков, ЖЭТФ **81**, 1872 (1981).
45. T. M. Rice, H. Launois, and J. P. Pouget, Phys. Rev. Lett. **73**, 3042 (1994).
46. R. M. Wentzcovitch, W. W. Schulz, and P. B. Allen, Phys. Rev. Lett. **73**, 3043 (1994).
47. О. Маделунг, *Физика твердого тела: локализованные состояния*, Наука, Москва (1985), с. 144.
48. Н. Н. Боголюбов, Н. Н. Боголюбов (мл.), *Введение в квантовую статистическую механику*, Наука, Москва (1984), с. 282.
49. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989), с. 273.
50. Н. Р. Белашенков, В. Б. Карасев, А. А. Солунин и др., ФТТ **36**, 2475 (1994).
51. В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников, *Физика полупроводников*, Наука, Москва, (1990), с. 258.
52. С. А. Ахманов, Ю. Е. Дьяков, А. С. Чиркин, *Введение в статистическую радиофизику и оптику*, Наука, Москва (1981), с. 42.
53. Д. Н. Клышко, *Физические основы квантовой электроники*, Наука, Москва, (1986), с. 22.
54. А. С. Давыдов, *Теория твердого тела*, Наука, Москва (1976), с. 296.
55. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Наука, Москва (1978), с. 236.
56. A. Cavalleri, Th. Dekorsy, H. N. Chong et al., E-print archives, cond-mat/0403214; Phys. Rev. B **70**, 161102(R) (2004).
57. A. Cavalleri, Cs. Toth, C. W. Siders et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 237401 (2001).